

ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС КАК СРЕДСТВО МОДИФИКАЦИИ ВЕЩЕСТВА

Б.В. Скворцов, Д.Б. Скворцов, Д.М. Живоносная
Самарский университет, г. Самара

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) является, эффективным приёмом исследования вещества и позволяет получать сведения об энергетических релаксационных процессах в среде, о внутренних полях кристаллов, о строении молекул, и т.д. [1]. Состояние ЯМР среды достигается в специальных схемах радиочастотного облучения вещества с помощью катушки индуктивности при наличии постоянного магнитного поля, ортогонального по направлению переменному электромагнитному полю. ЯМР возникает как результат поглощения радиочастотного излучения веществом, находящимся в магнитном поле. Основное уравнение, определяющее частоту ядерного магнитного резонанса, имеет вид [1]:

$$\omega_0 = \gamma H_0 (1 - \sigma) \approx \gamma H_0,$$

где γ – гиромагнитное отношение [$Tл^{-1} \cdot сек^{-1}$], характеризующее данный вид ядер, H_0 – напряжённость постоянного магнитного поля [$Tл$], σ – константа экранирования, которая составляет $\sigma = 10^{-5} \div 10^{-6}$ и учитывается только в системах ЯМР высокого разрешения.

С электрической точки зрения ЯМР проявляется в существенном изменении на резонансной частоте реактивного сопротивления катушки индуктивности, причиной которого является изменение комплексной магнитной проницаемости контролируемой среды $\mu(\omega) = \mu'(\omega) - j\mu''(\omega)$.

В процессе исследований получены более точные, по сравнению с известными [1], формулы, описывающие частотные изменения компонентов магнитной проницаемости среды, которые имеют вид:

$$\mu'(\omega) = 1 + \frac{\chi_0}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2 H^2 T_1 T_2}, \quad \mu''(\omega) = -\frac{\chi_0 \omega T_2}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2 H^2 T_1 T_2}.$$

χ_0 – статическая магнитная восприимчивость вещества, T_1 , T_2 – время продольной и поперечной релаксации магнитных моментов резонирующего ядра, H – амплитуда напряжённости переменного магнитного поля.

Приведённые формулы впервые учитывают влияние магнитной вязкости среды на процесс возникновения ЯМР [2]. Модуль магнитной проницаемости среды в момент ЯМР определится по формуле:

$$|\mu(\omega)| = \sqrt{[\mu'(\omega)]^2 + [\mu''(\omega)]^2}$$

Из графика на рисунке 1 видно, что в момент резонанса диамагнитная среда становится парамагнитной, т.е. происходит молекулярная модификация среды (изменение структуры молекулы). При частотах $\omega < \omega_1$ и $\omega > \omega_2$ среда имеет диамагнитные свойства $|\dot{\mu}(\omega)| < 1$. В диапазоне частот $\omega_1 < \omega < \omega_2$ среда становится парамагнитной $|\dot{\mu}(\omega)| > 1$. Пример расчёта магнитной проницаемости *n*-гексана, C_6H_{14} ($\chi_0 = -77 \cdot 10^{-6}$, $|\dot{\mu}(0)| = 0,999967$) на частоте главного резонанса $\omega_0 = 89560179$, взятой из интернациональной базы данных [3], при $H = 10^{-3}$ Тл дал следующие результаты: $|\dot{\mu}(0)| = 1,000621$; модификация среды происходит в диапазоне частот $89007900 < \omega < 90119354$ Гц.

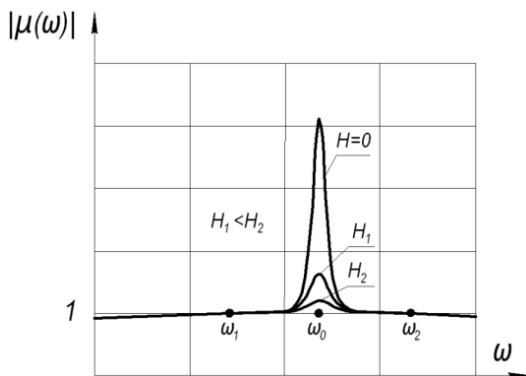


Рисунок 1 – Зависимость магнитной проницаемости от частоты при ЯМР

Показано, что на резонансной частоте происходит расщепление молекулы *n*-гексана на три активных радикала $R_1 = CH_3CH_2$, $R_2 = CH_2CH_2$, $R_3 = CH_2CH_3$, которые согласно [1] имеют парамагнитные свойства, и обладают значительно более высокими детонационными свойствами. В целом ЯМР можно использовать для модификации не только нефтепродуктов, а также других структурированных сред.

Список использованных источников

1. Дудкин, В.И. Квантовая электроника. Приборы и их применение [Текст]/ В.И. Дудкин, Л.Н. Пахомов. – М.: Техносфера, 2006. – 432 с.
2. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред 2 изд. [Текст]/ Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1982. – 621 с.
3. <http://riodb.ibase.aist.go.jp/>